Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theorie der Kondensierten Materie

Klausur 2: Moderne Theoretische Physik IIIa WS 18/19

Prof. Dr. Alexander Mirlin
Dr. Stefan Rex

Lösungen / Bewertungsgrundlage
15.04.2019

---

1. Diesel-Kreisprozess (insgesamt 30 Punkte)

Ein Dieselmotor kann näherungsweise durch einen idealisierten Kreisprozess beschrieben werden, der die Zustände 1, 2, 3, 4 in den Teilprozessen

$1 \to 2$	adiabatische Kompression,	$2 \to 3$	isobare Expansion,
$3 \to 4$	adiabatische Expansion,	$4 \to 1$	isochore (d.h. V=konst.) Abkühlung

durchläuft. Der Prozess wird durch die Kenngrößen $\nu = V_1/V_2$ und $\rho = V_3/V_2$ charakterisiert, wobei $1 < \rho < \nu$. Außerdem sei die Temperatur T_1 bekannt. Wir betrachten den Dieselprozess für ein klassisches ideales Gas mit f Freiheitsgraden.

(a) Leiten Sie, ausgehend von der inneren Energie $U = \frac{f}{2}Nk_BT$, zunächst allgemein die Änderung der Entropie beim Übergang von einem Anfangszustand mit T_a, V_a zu einem Endzustand mit T_e, V_e her. Berechnen Sie anhand dieses Ausdrucks den Adiabatenexponenten κ für beliebiges f.(κ ist durch den Zusammenhang pV^κ =konstant bei einer adiabatischen Zustandsänderung definiert.) **(6 Punkte)**

(b) Geben Sie die Temperaturen T_2, T_3 und T_4 in Abhängigkeit von T_1, ν, ρ und κ an. **(3 Punkte)**

(c) Geben Sie für die Prozesse 2→3 und 4→1 die Abhängigkeit der Temperatur von der Entropieänderung während des jeweiligen Prozesses an! **(4 Punkte)**

(d) Skizzieren Sie das p–V-Diagramm und das T–S-Diagramm! Die Zustände 1, 2, 3, 4 sollen in beiden Diagrammen gekennzeichnet sein. **(6 Punkte)**

(e) Berechnen Sie für alle Teilprozesse die Beiträge zur mechanischen Arbeit W und zur ausgetauschten Wärme Q und geben Sie diese jeweils als Vielfache der inneren Energie U_1 im Zustand 1 an, wobei der Faktor nur von κ, ρ, und ν abhängen soll. Vorzeichenkonvention: positive Beiträge in Q und W erhöhen die innere Energie des Gases, negative reduzieren diese. **(5 Punkte)**

(f) Berechnen Sie den Wirkungsgrad η des Kreisprozesses als Wärmekraftmaschine. Wie groß ist der Wirkungsgrad η_C einer Carnot-Maschine mit gleichem Verhältnis aus maximaler und minimaler Temperatur? Zeigen Sie für den Fall $\rho = 2$, dass $\eta < \eta_C$. **(6 Punkte)**

Lösung:

(a) Aus dem ersten Hauptsatz folgt:

$$dU = TdS - pdV = T\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_V dT + \left(T\left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_T - p\right)dV \qquad \textbf{(2 P)}$$

Dies vergleichen wir mit dem Differential der inneren Energie

$$dU = d\left(\frac{f}{2}Nk_BT\right) = \frac{f}{2}Nk_BdT$$

und erhalten

$$\left.\frac{\partial S}{\partial T}\right|_V = \frac{f}{2}\frac{Nk_B}{T} \qquad \text{und} \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$T\left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_T - p = 0 \quad \Rightarrow \quad \left.\frac{\partial S}{\partial V}\right|_T = \frac{p}{T} = \frac{Nk_B}{V}\,. \qquad \textbf{(1 P)}$$

Integration ergibt die Änderung der Entropie des idealen Gases:

$$\Delta S = \frac{f}{2}Nk_B\ln\left(\frac{T_e}{T_a}\right) + Nk_B\ln\left(\frac{V_e}{V_a}\right). \qquad \textbf{(1 P)}$$

Bei einer adiabatischen Zustandsänderung ist S konstant. Aus der vorigen Gleichung ergibt sich, dass dies der Fall ist wenn

$$TV^{2/f} = \text{konst.} \quad \text{bzw.} \quad pV^\kappa = \text{konst.} \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{f+2}{f} \qquad \textbf{(1 P)}$$

(b) $T_2 = \nu^{\kappa-1}T_1, \quad T_3 = \rho\nu^{\kappa-1}T_1, \quad T_4 = \rho^\kappa T_1$ **(3 P)**

(c) 2→3: p konstant also T/V konstant,

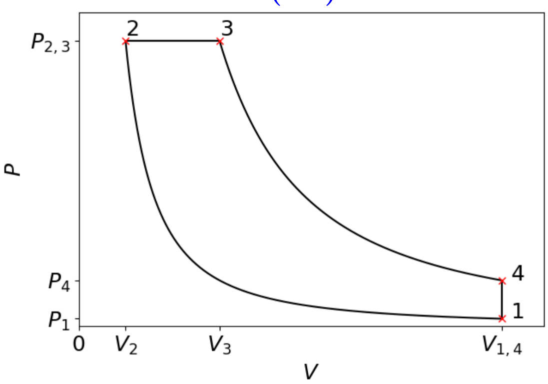
$$S(T) - S_2 = \left(\frac{f}{2}+1\right)Nk_B\ln\frac{T}{T_2} \quad \Rightarrow T(\Delta S_{2\to3}) = \nu^{\kappa-1}T_1\exp\left(\frac{2\Delta S}{(f+2)Nk_B}\right)$$

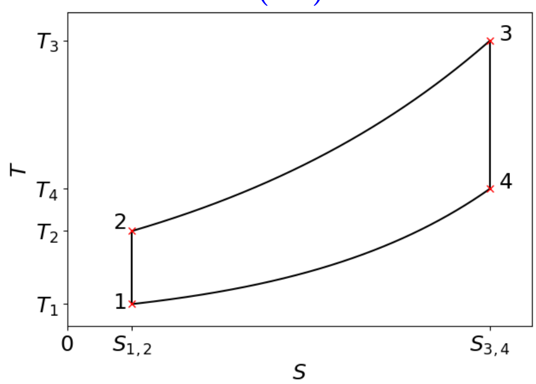
(2 P)

4→1: V konstant also

$$S(T) - S_4 = \frac{f}{2}Nk_B\ln\frac{T}{T_4} \quad \Rightarrow T(\Delta S_{4\to1}) = \rho^\kappa T_1\exp\left(\frac{2\Delta S}{fNk_B}\right) \qquad \textbf{(2 P)}$$

(d) **(3P)** **(3P)**





(e) 1→2: $Q_{12} = 0$ (adiabatisch) $\Rightarrow W_{12} = U_2 - U_1 = (\nu^{\kappa-1} - 1)\,U_1$ **(1 P)**

2→3: $W_{23} = -p_2(V_3 - V_2) = -Nk_BT_1(\rho-1)\nu^{\kappa-1} = -(\kappa-1)(\rho-1)\nu^{\kappa-1}U_1$, **(1 P)**
$Q_{23} = (U_3 - U_2) - W_{23} = \nu^{\kappa-1}(\rho-1)U_1 - W_{23} = \kappa(\rho-1)\nu^{\kappa-1}U_1$ **(1 P)**

3→4: $Q_{34} = 0$ (adiabatisch) $\Rightarrow W_{34} = U_4 - U_3 = -\rho\,(\nu^{\kappa-1} - \rho^{\kappa-1})\,U_1$ **(1 P)**

4→1: $W = 0$ (isochor) $\Rightarrow Q_{41} = U_1 - U_4 = -(\rho^\kappa - 1)\,U_1$ **(1 P)**

(f)

$$\eta = \frac{-\sum W}{Q_{23}} = \frac{\kappa\nu^{\kappa-1}(\rho-1)+1-\rho^\kappa}{\kappa(\rho-1)\nu^{\kappa-1}} = 1 - \frac{\rho^\kappa - 1}{\rho - 1}\frac{1}{\kappa\nu^{\kappa-1}} \qquad \textbf{(2 P)}$$

$$\eta_C = 1 - \frac{T_{\min}}{T_{\max}} = 1 - \frac{T_1}{T_3} = 1 - \frac{1}{\rho\nu^{\kappa-1}} \qquad \textbf{(1 P)}$$

Aus diesen Gleichungen folgt, dass $\eta < \eta_C \Leftrightarrow \kappa(\rho-1) < \rho(\rho^\kappa - 1)$ bzw.

$$\rho\,(\rho^\kappa - 1) - \kappa(\rho - 1) > 0 \qquad \textbf{(1 P)}$$

Diese Ungleichung beweisen wir nun für den Fall $\rho = 2$. Man erhält:

$$2\left(2^\kappa - 1\right) - \kappa > 2(2^{\kappa_{\min}} - 1) - \kappa_{\max} > 2(2^1 - 1) - \frac{5}{3} > 0 \qquad \textbf{(1 P)}$$

Dabei folgen $\kappa_{\max}$ und $\kappa_{\min}$ aus $3 \le f \le \infty$. **(1 P)**
Alternative: $f(\kappa) = 2(2^\kappa - 1) - \kappa$ ist an $\kappa = 1$ positiv und für alle $\kappa \ge 1$ monoton wachsend.

Bemerkung: Natürlich gilt $\eta < \eta_C$ auch für beliebige ρ, der Beweis ist dann aber erheblich aufwendiger.

2. Harmonisches Potential in 3D (insgesamt 25 Punkte)

Wir untersuchen Quantenteilchen der Masse m im harmonischen Potential $V(\mathbf{r}) = a\mathbf{r}^2$ in drei Dimensionen mit $a > 0$ und dem Ort $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$.

(a) Notieren Sie die Einteilchen-Energieniveaus E_n und berechnen Sie deren Entartungsgrad g_n für ein spinloses Teilchen. **(5 Punkte)**

(b) Wie lautet die kanonische Zustandssumme Z_1, wenn sich ein einzelnes Spin-1-Boson im System befindet? Berechnen Sie die freie Energie, die Entropie und die innere Energie des Systems in Abhängigkeit von der Temperatur! Wie lautet der Grenzwert der Entropie für $T \to 0$? **(10 Punkte)**

Hinweis: $\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}$; $\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} n q^n = \frac{q}{(1-q)^2}$; $\displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} n^2 q^n = \frac{q(q+1)}{(1-q)^3}$ (mit $|q| < 1$)

(c) Nun betrachten wir ein System von Spin-1-Bosonen mit Temperatur T und chemischem Potential μ im Potential $V(\mathbf{r})$. Wie lautet die großkanonische Zustandssumme Z_G und das großkanonische Potential Ω? Wie viele Teilchen N befinden sich im Mittel in dem System? (Die auftretenden unendlichen Summen müssen Sie nicht lösen.) **(5 Punkte)**

(d) Wiederholen Sie Teilaufgabe (c) für Spin-$\frac{1}{2}$-Fermionen anstelle der Spin-1-Bosonen! **(5 Punkte)**

Lösung:

(a) Der 3D harmonische Oszillator lässt sich in 3 1D Oszillatoren zerlegen:

$$H = \sum_{i=x,y,z}\left(\frac{p_i^2}{2m} + a r_i^2\right) \qquad \textbf{(1 P)}$$

Die Energieniveaus des 1D harmonischen Oszillators lauten bekanntlich $E_n^{1D} = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, wobei $n = 0, 1, 2, \dots$ und hier $\omega = \sqrt{2a/m}$. Im 3D Oszillator erhalten wir die Summe aus den drei 1D Energien

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \qquad n = n_x + n_y + n_z, \quad n = 0, 1, 2, \dots \qquad \textbf{(1 P)}$$

Der Entartungsgrad ergibt sich aus der Anzahl an Möglichkeiten, n auf n_x, n_y und n_z zu verteilen. Für ein bestimmtes $m = n_x + n_y$ gibt es $m + 1$ Möglichkeiten, m auf n_x und n_y zu verteilen. Dabei kann m nun alle Werte von 0 bis n annehmen. In der Summe erhalten wir damit den Entartungsgrad

$$g_n = \sum_{m=0}^{n} (m+1) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2)\,. \qquad \textbf{(3 P)}$$

Alternativ kann man auch den Binomialkoeffizienten $\binom{n+2}{n}$ verwenden.

(b) Spin-1 $\Rightarrow$ dreifache Spin-Entartung aller Niveaus, also

$$\begin{aligned}
Z_1 &= 3 \sum_n g_n e^{-\beta E_n} && \textbf{(1 P)} \\
&\overset{q=e^{-\beta\hbar\omega}}{=} \left[\frac{3}{2} \sum_n n^2 q^n + \frac{9}{2} \sum_n n q^n + 3 \sum_n q^n \right] e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega} \\
&\overset{\text{Hinweis}}{=} \left[\frac{3}{2} \frac{q(q+1)}{(1-q)^3} + \frac{9}{2} \frac{q}{(1-q)^2} + \frac{3}{1-q} \right] e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega} && \textbf{(2 P)} \\
&= \frac{3q^{\frac{3}{2}}}{(1-q)^3} = \frac{3}{8\sinh^3\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega\right)} && \textbf{(1 P)}
\end{aligned}$$

Dies entspricht dem Ergebnis des 1D harmonischen Oszillators hoch $D = 3$ (abgesehen von der Spin-Entartung), was man sich auch ohne Rechnung überlegen kann. Freie Energie:

$$F = -k_B T \ln Z_1 = -\frac{\ln 3}{\beta} + \frac{3}{\beta} \ln \left[2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta\hbar\omega \right) \right] \qquad \textbf{(2 P)}$$

Entropie:

$$\begin{aligned}
S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \beta} F \\
&= k_B \left[\ln 3 - 3 \ln 2 \sinh \left(\frac{1}{2} \beta\hbar\omega \right) + \frac{3}{2} \beta\hbar\omega \coth \left(\frac{1}{2} \beta\hbar\omega \right) \right] && \textbf{(2 P)}
\end{aligned}$$

$$S(T) \xrightarrow{T \to 0} k_B \ln 3 \quad \text{(Entartung des Grundzustandes)} \qquad \textbf{(1 P)}$$

Innere Energie:

$$U = F + TS = \frac{3}{2} \hbar\omega \coth \left(\frac{1}{2} \beta\hbar\omega \right) \qquad \textbf{(1 P)}$$

(c) Großkanonische Zustandssumme (wieder dreifache Spinentartung):

$$Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda = \prod_{n=0}^{\infty} \left(Z^B_{(n)}\right)^{3g_n} = \prod_n \left(\frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{3}{2})+\beta\mu}}\right)^{3g_n} \qquad \textbf{(2 P)}$$

$$\Omega = -k_B T \ln Z_G = \frac{3}{2\beta}\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)(n+2)\ln\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{3}{2})+\beta\mu}\right) \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$\langle N\rangle = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = \frac{3}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(n+1)(n+2)}{\left(e^{\beta\hbar\omega(n+\frac{3}{2})-\beta\mu} - 1\right)} = \frac{3}{2}\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)(n+2)n_B(E_n,\mu) \qquad \textbf{(2 P)}$$

(d) Spin-$\frac{1}{2}$-Fermionen: zweifache Spinentartung aller Niveaus

$$Z_G = \prod_\lambda Z_\lambda = \prod_{n=0}^{\infty} \left(Z^F_{(n)}\right)^{2g_n} = \prod_n \left(1 + e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{3}{2})+\beta\mu}\right)^{2g_n} \qquad \textbf{(2 P)}$$

$$\Omega = -k_B T \ln Z_G = -\frac{1}{\beta}\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)(n+2)\ln\left(1 + e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{3}{2})+\beta\mu}\right) \qquad \textbf{(1 P)}$$

$$\langle N\rangle = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(n+1)(n+2)}{\left(e^{\beta\hbar\omega(n+\frac{3}{2})-\beta\mu} + 1\right)} = \sum_{n=0}^{\infty}(n+1)(n+2)n_F(E_n,\mu) \qquad \textbf{(2 P)}$$

3. Thermodynamisches Potential (insgesamt 12 Punkte)

Von einem magnetischen System sei die Enthalpie H (bei fester Teilchenzahl) bekannt. Drücken Sie die Magnetokompressibilität bei konstanter Temperatur und konstantem Druck

$$\kappa = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial B}\right)_{T,P}$$

ausschließlich durch Ableitungen von H aus. Der magnetische Beitrag zum Differential dH lautet $-MdB$ mit der Magnetisierung M und dem Feld B. **(12 Punkte)**

Hinweis: Wenn $f(x,y) =$ konst. so gilt $\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_f = -\frac{\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x}{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y}$.

Lösung:

Das gegebene Potential ist $H = H(S,P,B)$, jedoch benötigen wir $V = V(T,P,B)$. Daher müssen wir von (S,P,B) zu (T,P,B) als unabhängige Variablen übergehen:

$$\begin{aligned}
dV &= \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{P,B} dS + \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{S,B} dP + \left(\frac{\partial V}{\partial B}\right)_{S,P} dB \\
&= \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{P,B}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{P,B} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_{T,B} dP + \left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_{T,P} dB\right] + \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_{S,B} dP + \left(\frac{\partial V}{\partial B}\right)_{S,P} dB \\
&\overset{dT=dP=0}{=} \left[\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_{P,B}\left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_{T,P} + \left(\frac{\partial V}{\partial B}\right)_{S,P}\right] dB \qquad \textbf{(3 P)}
\end{aligned}$$

Nun setzen wir für V ein

$$V = \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_{S,B}, \qquad \textbf{(1 P)}$$

was aus dem Differential $dH = TdS + VdP - MdB$ folgt, und erhalten **(1 P)**

$$\kappa = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial B}\right)_{T,P} = -\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)^{-1}\left[\frac{\partial^2 H}{\partial P\,\partial S}\left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_{T,P} + \frac{\partial^2 H}{\partial P\,\partial B}\right] \qquad \textbf{(2 P)}$$

Die verbleibende Ableitung folgt aus der Relation

$$\left(\frac{\partial S}{\partial B}\right)_T = -\frac{\left(\frac{\partial T}{\partial B}\right)_S}{\left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_B} \qquad \textbf{(2 P)}$$

die man mit dem Hinweis angewendet auf $T = T(S,B) =$ konst. erhält ($P =$ konst. ändert nichts an $T(S,B) =$ konst. und muss nicht besonders berücksichtigt werden). Damit ergibt sich zusammen mit

$$T = \left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_{P,B} \qquad \textbf{(1 P)}$$

die Magnetokompressibilität

$$\kappa = -\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)^{-1}\left[-\left(\frac{\partial^2 H}{\partial P\,\partial S}\right)\left(\frac{\partial^2 H}{\partial S\,\partial B}\right)\left(\frac{\partial^2 H}{\partial S^2}\right)^{-1} + \frac{\partial^2 H}{\partial P\,\partial B}\right] \qquad \textbf{(2 P)}$$

4. Dichtematrix (insgesamt 8 Punkte)

(a) Notieren Sie zunächst allgemein die drei wesentlichen Eigenschaften einer Dichtematrix ρ (in einer Basis aus normierten orthogonalen Zuständen eines Quantensystems)! **(3 Punkte)**

(b) Nun betrachten wir die Matrix

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}a & -\frac{\sqrt{3}}{4}a & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{4}a & \frac{1}{4}a & 0 \\ 0 & 0 & a+b \end{pmatrix}$$

mit den Parametern a und b aus den komplexen Zahlen. Welche Bedingungen müssen a und b erfüllen, damit ρ eine Dichtematrix ist? **(3 Punkte)**

(c) Unter welcher zusätzlichen Bedingung beschreibt ρ aus (b) einen reinen Zustand? **(2 Punkte)**

Lösung:

(a)
1. hermitesch, d.h. $\rho_{ij} = \rho^*_{ji}$ **(1 P)**
2. normiert, d.h. $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$ **(1 P)**
3. positiv definit, d.h. $\forall\Psi : \langle\Psi|\rho|\Psi\rangle \geq 0$ **(1 P)**

(b) hermitesch: nur wenn a und b reell **(1 P)**
$\mathrm{Tr}\,\rho = 2a + b \quad \Rightarrow 2a + b = 1$
positiv definit $\Leftrightarrow$ alle Eigenwerte ≥ 0. Eigenwerte: $0, a, a + b$

Insgesamt muss gelten $a \in [0, 1]$ und $b = 1 - 2a$. **(2 P)**

(c) Reiner Zustand: genau ein Eigenwert ist 1, alle anderen Eigenwerte sind null **(1 P)**
Daher beschreibt ρ nur einen reinen Zustand, wenn entwerde $a = 0$ und $b = 1$, oder $a = 1$ und $b = -1$. **(1 P)**